

БЛИЖНЕПОЛЬНАЯ ОПТИКА ПОВЕРХНОСТИ ДИЭЛЕКТРИКА

© 2001 г. С. В. Сухов

Ульяновское отделение Института радиотехники и электроники РАН, 432011 Ульяновск, Россия

Поступила в редакцию 27.09.2000 г.

Решена задача классической оптики о распределении электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды с учетом ее дискретной структуры. Предложен способ учета влияния зонда на оптические наблюдения в ближней зоне, получено условие, при котором этим влиянием можно пренебречь. Показано, что на основе ближнеполюсных наблюдений можно получать информацию не только о структуре поверхности, но и о действующих полях в приповерхностной области. Предложен способ оптического контроля положения зонда над поверхностью.

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с бурным развитием ближнеполюсных оптических микроскопов и с появлением возможности достижения ими в ближайшем будущем атомного разрешения возникает необходимость в описании поведения электромагнитных полей вблизи поверхностей с учетом их дискретной структуры. При этом акцент в теоретических исследованиях должен сместиться от нахождения полей вблизи отдельных микроскопических объектов [1–4] к описанию когерентного отклика от более или менее регулярно расположенных объектов – атомов на поверхности. Подобного же рода задачи возникают и при описании ближнего поля около поверхностей фотонных [5] или плазмонных [6] кристаллов. Однако до сих пор лишь небольшое число теоретических и экспериментальных работ (в основном появившихся в последнее время) было посвящено теме описания ближнего поля вблизи поверхности с регулярно расположенными на ней объектами [5–9]. В частности, в работах [5] и [9] на примере гексагональной и кубической решеток было показано, что ближнее поле дает существенный вклад в оптический отклик на расстояниях порядка одной-двух постоянных решетки и поляризация ближнего поля не имеет фиксированного направления и изменяется в различных точках вблизи поверхности. В данной работе дан более подробный анализ особенностей, обнаруженных в работах [5] и [9], и сделано обобщение на случай решеток с произвольной симметрией расположения атомов при учете влияния на ближнее поле приповерхностной области и при учете возмущения, создаваемого зондом ближнеполюсного микроскопа.

Как и в работе [9], в данной статье рассмотрена безапертурная схема ближнеполюсного микроскопа, в качестве зонда которого выступает одиночный диполь с линейной поляризуемостью α_p .

Схему эксперимента, в которой роль зонда выполняет одиночный атом, можно реализовать практически, если, например, использовать атом в магнитооптической ловушке [10] или атом примеси, внедренный в иглу ближнеполюсного микроскопа [8, 11].

Цель данной работы заключается в том, чтобы исследовать поведение электромагнитного поля вблизи поверхности с учетом ее дискретной структуры и вычислить интенсивность электромагнитного поля на зонде при перемещении (сканировании) его вдоль поверхности пленки на некотором заданном расстоянии, а затем попытаться восстановить параметры среды на основе ближнеполюсных наблюдений. При этом необходимо учитывать взаимное влияние, оказываемое зондом и поверхностными атомами друг на друга.

2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

В качестве объекта исследования выберем тонкую диэлектрическую пленку. Расположим систему координат таким образом, чтобы ось z была направлена нормально поверхности пленки. Начало координат расположим на поверхности пленки. Будем полагать, что атомы в пленке расположены в узлах идеальной кристаллической решетки, причем векторы элементарных трансляций \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 направлены параллельно поверхности пленки. Следуя данному выбору, будем рассматривать диэлектрическую пленку как систему N монослоев, находящихся на расстоянии $a = (\mathbf{a}_3)_z$ друг от друга. Атомы поверхности возбуждаются со стороны положительных значений z монохроматической волной:

$$\mathbf{E}_I(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t).$$

Рассматривая стационарный случай, уравнение для напряженности локального электрического

поля на зонде \mathbf{E}_p можно записать в виде [12, 13]

$$\mathbf{E}_p(\mathbf{r}) = \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) + \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j(x_a, y_a) G(R_{a_j}),$$

$\mathbf{r} = (x, y, z)$ – радиус-вектор местоположения зонда (зонд расположен над поверхностью пленки $z > 0$), α – микроскопическая поляризуемость атомов пленки, которая, как предполагается, не зависит от поля. $G(R) = \exp(ik_0 R)/R$ – функция Грина уравнения Гельмгольца, $k_0 = \omega/c$ – волновое число в вакууме, $R_{a_j} = |\mathbf{R}_{a_j}| = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{a_j}|$, $\mathbf{r}_{a_j} = (x_{a_j}, y_{a_j}, z_j)$. Введены также следующие обозначения:

$$\mathbf{E}_j(x, y) = \mathbf{E}(x, y, z_j), \quad z_j = -(j-1)a, \quad j = \overline{1, N}.$$

Пусть $\mathbf{r}_{a_l} = (x_{a_l}, y_{a_l}, z_l)$ – радиус-вектор некоторого атома l -го монослоя пленки. Тогда для локального поля на этом атоме будем иметь

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l(x_{a_l}, y_{a_l}) &= \\ &= \mathbf{E}_{II}(x_{a_l}, y_{a_l}) + \alpha_p \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \mathbf{E}_p(\mathbf{r}) G(R_{a_l}) + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \mathbf{E}_j(x_a, y_a) G(R_{a_l a_j}), \\ l &= \overline{1, N}, \end{aligned}$$

где $\mathbf{E}_{II}(x_{a_l}, y_{a_l}) = \mathbf{A}_l(\mathbf{r}_{a_l})$, $R_{a_l a_j} = |\mathbf{r}_{a_l} - \mathbf{r}_{a_j}|$.

Решение для поля в l -м монослое будем искать в виде

$$\mathbf{E}_l(x_{a_l}, y_{a_l}) = \mathbf{E}_l^0(x_{a_l}, y_{a_l}) + \mathbf{E}_l^p(x_{a_l}, y_{a_l}).$$

$\mathbf{E}_l^0(x_{a_l}, y_{a_l})$ является решением задачи взаимодействия поля излучения с пленкой без учета возмущающего действия зонда. Таким образом, поле $\mathbf{E}_l^0(x_{a_l}, y_{a_l})$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_l^0(x_{a_l}, y_{a_l}) &= \mathbf{E}_{II}(x_{a_l}, y_{a_l}) + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \mathbf{E}_j^0(x_a, y_a) G(R_{a_l a_j}). \end{aligned} \quad (1)$$

Часть поля \mathbf{E}_l^p определяется только полем точечного диполя. Таким образом, поля \mathbf{E}_l^p и \mathbf{E}_p будут

определены как решения системы уравнений

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_p(\mathbf{r}) &= \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j^0(x_a, y_a) G(R_{a_j}) + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j^p(x_a, y_a) G(R_{a_j}), \\ \mathbf{E}_l^p(x_{a_l}, y_{a_l}) &= \alpha_p \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \mathbf{E}_p(\mathbf{r}) G(R_{a_l}) + \\ &+ \alpha \sum_{j=1}^N \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \nabla_{\mathbf{r}_{a_l}} \times \mathbf{E}_j^p(x_a, y_a) G(R_{a_l a_j}). \end{aligned} \quad (2)$$

Таким образом, для решения исходной задачи вначале необходимо решить однородную задачу (1), а затем использовать это решение для нахождения возмущения, создаваемого зондом в пленке, и обратного влияния этого возмущения на зонд (2), (3). Однако сначала будет выполнена оценка возмущения, создаваемого зондом в пленке, и выяснено, насколько это возмущение существенно.

3. ОЦЕНКА ВОЗМУЩЕНИЯ, ВНОСИМОГО ЗОНДОМ

Оценим величину \mathbf{E}_p , фигурирующую в системе (2), (3). Решение граничной задачи определения поля диполя, находящегося вблизи поверхности, в данном случае затруднено необходимостью учета дискретного распределения атомов. Поступим следующим образом. Возмущающее поле в среде \mathbf{E}_l^p , создаваемое зондом, быстро затухает при удалении от него. А если учесть и то, что влияние соседних диполей друг на друга также быстро падает с расстоянием, то и сам зонд и ближайшие к нему атомы будут испытывать лишь влияние атомов из небольшой области вокруг них.

Таким образом, необходимо найти поля $\mathbf{E}_l^p(x_{a_l}, y_{a_l})$ лишь на небольшой группе атомов в непосредственной близости от зонда. Оценим размеры области L_p , содержащей эти атомы.

В качестве нулевого приближения можно положить, что поведение поля в среде имеет тот же характер, как и у поля, создаваемого зондом

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^p(x_a, y_a) &\propto \left[\left(\frac{3(\mathbf{E}_p \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^5} - \frac{\mathbf{E}_p}{R_a^3} \right) - \right. \\ &- \left. ik_0 \left(\frac{3(\mathbf{E}_p \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^4} - \frac{\mathbf{E}_p}{R_a^2} \right) - k_0^2 \left(\frac{(\mathbf{E}_p \mathbf{R}_a) \mathbf{R}_a}{R_a^3} - \frac{\mathbf{E}_p}{R_a} \right) \right] \times \\ &\times \exp(ik_0 R_a). \end{aligned} \quad (4)$$

Определим напряженность поля на ближайшем к зонду атоме. Учитывая то, что поле на зонде будет определяться только атомами, расположенными в ближней зоне, в (4) можно оставить лишь слагаемые, содержащиеся в знаменателе третьей степени межатомного расстояния. Выражение (4) подставляется в (3). Далее в (3) выполняется переход от суммирования к интегрированию. Интеграл в (3) вычисляется по всему объему пленки, за исключением небольшой области вокруг атома, находящегося в точке наблюдения, чтобы исключить самовоздействие этого атома. Размеры этой области ρ – порядка постоянной решетки. В работе [14] было показано, что для достижения полного соответствия при переходе от дискретного к непрерывному случаю нужно положить $\rho = \frac{3}{4}a$. Далее, после выполнения соответствующих вычислений получаем следующую оценку для радиуса сферы L_p , в пределах которой необходимо рассчитывать поля на атомах:

$$L_p \approx \rho \delta^{-1/3},$$

где δ – погрешность вычислений. В качестве примера: пусть $\delta = 0.1\%$, тогда $L_p \approx 7a$. Следует заметить, что в расчетах, вероятно, следует брать еще меньшие значения L_p , так как в уравнение (3) входит еще поле, создаваемое зондом, по сравнению с которым влияние удаленных атомов еще больше уменьшается.

Проделав аналогичные рассуждения для уравнения (2), получаем, что основной вклад в поле на зонде вносят лишь атомы, лежащие внутри сферы радиуса в L_p с центром в месте расположения зонда. Таким образом, система (2), (3) сводится к системе относительно небольшого числа линейных алгебраических уравнений, которые можно решать численными методами, определив сначала поле \mathbf{E}_i^0 из уравнения (1). Однако, как будет показано ниже, во многих случаях решение этой системы окажется излишним из-за незначительного влияния части поля \mathbf{E}_i^p на зонд.

Предположим для определенности, что зондирующий атом находится над каким-либо поверхностным атомом пленки. Поле, создаваемое зондом в месте расположения атома, определяется следующим выражением:

$$E_{ef} = -\alpha_p \mathbf{E}_p / d^3. \quad (5)$$

Здесь d – расстояние от зонда до атома. При получении формулы (5) запаздывающая часть поля была отброшена. Поле на зонде считается поляризованным параллельно поверхности пленки в предположении, что вариации направления вектора поляризации не сильно скажутся на конеч-

ных результатах. Выше было показано, что при расчете поля на зонде достаточно учитывать лишь атомы, находящиеся внутри сферы радиуса L_p . Остальная часть пленки не оказывает заметного влияния на зонд. Таким образом, рассчитаем влияние, оказываемое на зонд шаровым сегментом с центром в атоме, расположенном прямо под зондом. Очевидно, что амплитуда микроскопического поля в пленке на этом атоме достигает максимального значения. Оценка сверху для амплитуды поля в месте расположения этого атома дает следующее выражение:

$$|E_{\max}| \leq |E_{ef}| [1 - sC \ln(L_p/\rho)]^{-1}. \quad (6)$$

Здесь $C = \alpha/(a|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|)$, s – коэффициент порядка единицы, зависящий от структуры атомной решетки. Будем считать, что поле на каждом атоме внутри шарового сегмента постоянно и равно полю на центральном атоме E_{\max} . Очевидно, что в этом случае влияние, оказываемое шаровым сегментом на зондирующий атом, увеличится. Наши вычисления носят оценочный характер, поэтому перейдем от суммирования по атомам к интегрированию, предполагая, что при этом поле в ближней зоне от поверхности пленки не сильно изменится по величине. Вычисляя поле в месте расположения зонда, получаем

$$|(\mathbf{E}_R)_{ef}| < 1.7C |E_{\max}| \ln\left(\frac{L_p + d}{d}\right). \quad (7)$$

Это выражение является оценкой сверху последнего слагаемого в правой части уравнения (3). Учитывая (5)–(7), получаем условие, при котором этим слагаемым можно пренебречь,

$$1.7C \frac{\alpha_p}{d^3} \ln\left(\frac{L_p + d}{d}\right) [1 - sC \ln(L_p/\rho)]^{-1} \ll 1. \quad (8)$$

Следует отметить, что условие (8) остается неизменным независимо от того, как возбуждаются поверхностные атомы: волной, идущей со стороны зонда, волной, испытывающей полное внутреннее отражение, или излучением, создаваемым самим зондом.

В (8) $\ln(L_p/d + 1)$ и $\ln(L_p/\rho)$ составляют величину порядка единицы, для диэлектрических сред $C \sim 10^{-1}$, $\alpha_p/d^3 \sim 10^{-1}$ на расстояниях порядка одной постоянной решетки от поверхности, следовательно, неравенство (8) достаточно хорошо выполняется. Таким образом, на расстояниях зонда от поверхности порядка межатомного обратным влиянием поверхности пленки на зонд в первом приближении можно пренебречь. В этом случае поле на зонде определяется полем внешней волны и частью поля \mathbf{E}_i^0 в пленке. Определению величины \mathbf{E}_i^0 посвящен следующий раздел.

4. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЯ ВНУТРИ ПЛЕНКИ (РЕШЕНИЕ НЕВОЗМУЩЕННОЙ ЗАДАЧИ)

Пусть внешняя волна является плоской, т.е.

$$\mathbf{A}_j(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_{0j} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}),$$

$$\mathbf{k}_0 = k_0(\sin\Theta_I \cos\Phi_I, \sin\Theta_I \sin\Phi_I, -\cos\Theta_I),$$

где Θ_I – угол падения, а азимутальный угол Φ_I определяет ориентацию плоскости падения.

В соответствии с разбиением объема пленки на отдельные монослои радиус-вектор произвольного атома j -го монослоя можно записать в виде

$$\mathbf{r}_{a_j} = \mathbf{r}_j^0 + \mathbf{a}_{mn} = \mathbf{r}_j^0 + m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2,$$

где m, n – целые числа; \mathbf{r}_j^0 – радиус-вектор некоторого атома в j -м монослое. Учитывая однородность поверхностей пленки, решение для локального поля в среде можно записать в виде

$$\mathbf{E}_l^0(x, y) = \mathbf{E}_l^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{a}_{mn}).$$

Если бы атомы в каждом монослое были распределены нерегулярным образом, то наилучшим способом расчета решеточных сумм в уравнении (1), вероятно, следовало бы считать метод сферы Лоренца, согласно которому атомы, находящиеся

вблизи точки наблюдения, по-прежнему считаются дискретно-распределенными, а более далекие атомы считаются непрерывно-распределенными. Такой способ расчета был использован в работах [9, 14–16]. В данной задаче полагается, что атомы в монослоях распределены регулярно. В этом случае можно предложить более удобный по сравнению с методом сферы Лоренца способ расчета решеточных сумм.

Если точка наблюдения не лежит в монослое, по которому в данный момент выполняется суммирование, то оператор $\nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times$ в уравнении (1) можно вынести из-под знака суммы. Для вычисления получающейся суммы воспользуемся методом фурье-преобразования [17–19]. Выполняя операцию $\nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times$, получаем окончательное выражение для поля диполей вблизи j -го монослоя:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, z_j) &= \alpha \sum_{a_j} \nabla_{\mathbf{r}} \times \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{E}_j^0 \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{a}_{mn}) G(R_{a_j}) = \\ &= -\frac{2\pi i \alpha}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|} \sum_{p, q = -\infty}^{\infty} [\mathbf{k}_{pq} [\mathbf{k}_{pq} \mathbf{E}_j^0]] \frac{\exp(i\mathbf{k}_{pq}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^0))}{\kappa_{pq}}, \quad (9) \\ \mathbf{k}_{pq} &= \begin{cases} (\mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel}, \kappa_{pq}), & z > z_j, \\ (\mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel}, -\kappa_{pq}), & z < z_j, \end{cases} \end{aligned}$$

$\mathbf{k}_0^{\parallel} = k_0(\sin\Theta_I \cos\Phi_I, \sin\Theta_I \sin\Phi_I, 0)$, $\kappa_{pq} = \sqrt{k_0^2 - (\mathbf{k}_0^{\parallel} + \mathbf{g}_{pq}^{\parallel})^2}$, $\mathbf{g}_{pq}^{\parallel} = p\mathbf{g}_1 + q\mathbf{g}_2$, где $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ – векторы обратной решетки на поверхности. Определим $\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2$ таким образом, чтобы $|\mathbf{g}_1|, |\mathbf{g}_2|$ были минимальными из всего набора $|\mathbf{g}_{pq}|$.

Заметим, что формула (9) справедлива не только для случая, когда атомы расположены в узлах идеальной кристаллической решетки, но также и в том случае, когда среда имеет лишь ближний порядок. Действительно, метод, использующий фурье-преобразование и метод сферы Лоренца, дает аналогичные результаты. В то же время для метода сферы Лоренца как раз и важен только ближний порядок. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведена зависимость амплитуды поля диполей от радиуса сферы Лоренца для различных точек наблюдения. Из рисунка видно, что конкретная величина поля диполей определяется в основном атомами, находящимися в пределах 2–3 постоянных решетки от точки наблюдения. Порядок распределения атомов за пределами этой области практически не оказывает на поле диполей никакого влияния.

Выражение для поля вблизи j -го монослоя (9) по-прежнему представляется в виде двойной суммы. Однако для расстояний от монослоя $|z - z_j| \geq a$ эта сумма сходится гораздо быстрее, чем перво-

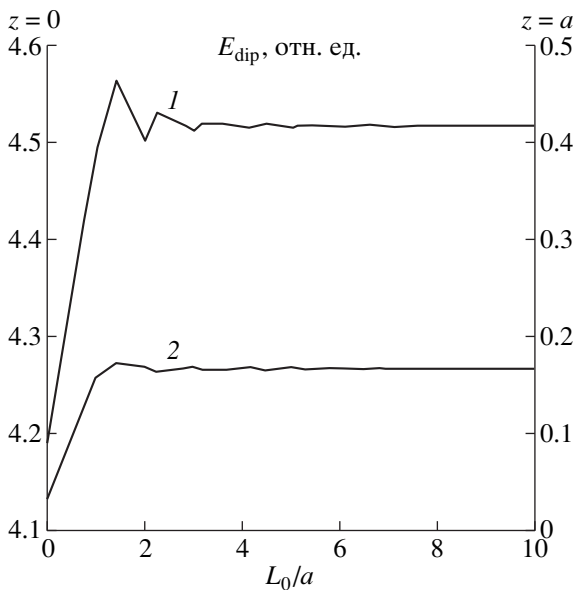


Рис. 1. Зависимость поля диполей E_{dip} от размеров принимаемой во внимание области дискретного распределения атомов L_0 . Внешняя волна падает нормально поверхности монослоя. Атомы в монослое расположены в узлах квадратной решетки. Точка наблюдения находится в монослое (кривая 1); точка наблюдения находится на расстоянии одной постоянной решетки от поверхности (кривая 2).

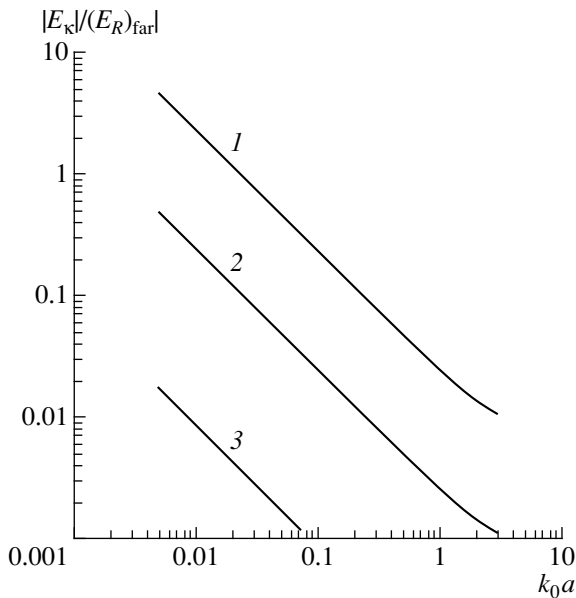


Рис. 2. Отношение амплитуд эванесцентных волн вблизи поверхности монослоя E_k к амплитуде поля отраженной волны в волновой зоне $(E_R)_{\text{far}}$. Атомы в монослое распределены в узлах квадратной решетки. Внешняя волна падает нормально на поверхность. Расстояние от точки наблюдения до пленки составляет одну постоянную решетки. 1 – $E_1/(E_R)_{\text{far}}$, 2 – $E_2/(E_R)_{\text{far}}$, 3 – $E_4/(E_R)_{\text{far}}$.

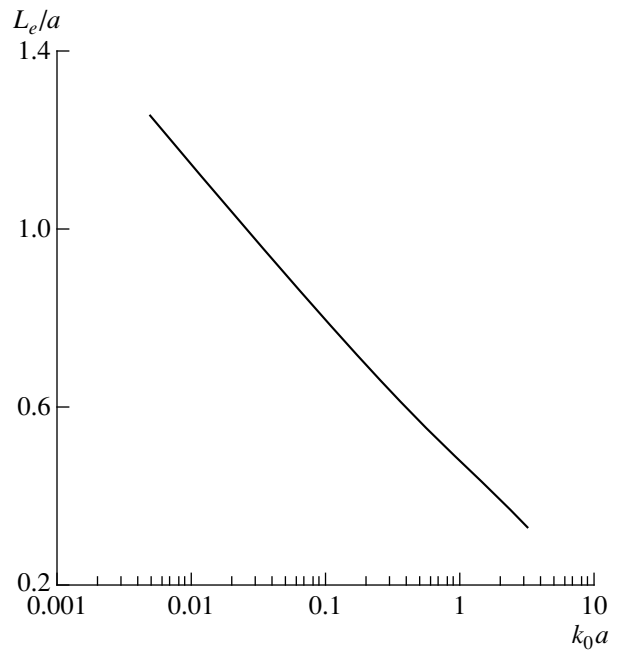


Рис. 3. Зависимость расстояния равной амплитуды эванесцентной и незатухающей частей поля отраженной волны L_e от соотношения длины волны и постоянной решетки $k_0 a$. Внешняя волна падает нормально к поверхности монослоя с квадратной решеткой.

начальная. Обычно в этой сумме достаточно оставить лишь несколько слагаемых с минимальными $|\mathbf{g}_{pq}^{\parallel}|$. Рассмотрим следующий пример. При нормальном падении света на монослой с квадратной решеткой вблизи поверхности монослоя можно выделить эванесцентные волны, коэффициенты затухания которых зависят от параметра $\kappa = p^2 + q^2$. На рис. 2 представлено соотношение амплитуд эванесцентных гармоник E_k , у которых значение параметра κ равно 0 (плоская отраженная волна $(E_R)_{\text{far}}$), 1, 2 и 4. Следует заметить, что соотношение амплитуд E_k сильно зависит от расстояния между зондом и поверхностью пленки. Характер их поведения, изображенный на рис. 2, справедлив для расстояний, равных одной или более постоянных решетки до поверхности. Обычно для таких расстояний изменение p и q в пределах от -2 до 2 обеспечивает точность вычислений поля порядка долей процента. Из вида зависимостей, представленных на рис. 2, следует, что при $k_0 a = \pi$ (значению, характерному для фотонных кристаллов и оптических решеток) отдельные монослои не “чувствуют” эванесцентных волн, исходящих от других атомных плоскостей. При $z = 2a$ отношение затухающей и незатухающей частей поля равно $\sim 1\%$ при $k_0 a = 0.005$ и быстро уменьшается с увеличением параметра $k_0 a$.

На рис. 3 изображена зависимость от параметра $k_0 a$ расстояния L_e , на котором амплитуды затухающей и незатухающей частей поля вблизи пленки оказываются равными. В силу быстрого затухания эванесцентных волн значения L_e дают представление о том, на каких расстояниях эванесцентные волны вносят существенный вклад в результирующее поле. Из зависимости, приведенной на рис. 3, следует, что при любых значениях параметров нет необходимости учитывать эванесцентные волны на расстояниях от поверхности, больших, чем две постоянные решетки.

Согласно представлениям работ [15, 16], неэкспоненциальная зависимость поля вблизи поверхности сохраняется пока сфера Лоренца, проведенная из точки наблюдения, пересекает поверхность. Таким образом, рис. 3, кроме того, дает представление о размерах сферы Лоренца и еще раз подтверждает сделанное выше утверждение о том, что для определения микроскопического поля важно знать конкретное распределение диполей лишь в небольшой области, окружающей точку наблюдения.

Если точка наблюдения находится внутри монослоя, то по-прежнему для вычисления решеточных сумм целесообразно использовать метод, подробно изложенный в [9, 14]. А именно вокруг точки наблюдения проводится окружность ради-

уса $L_0 > a$. При этом атомы, находящиеся внутри окружности, рассматриваются как диполи с дискретным распределением, а атомы вне окружности считаются непрерывно распределенными. Чтобы уменьшить размер дискретной области, не увеличивая при этом ошибку вычислений, радиус окружности нужно выбирать из таких соображений, чтобы площадь охватываемого ей круга равнялась площади, занимаемой атомами, находящимися внутри окружности [20]. Иными словами, если N_{at} – число атомов внутри окружности, то

$$L_0 = \sqrt{N_{at} |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| / \pi}.$$

В этом случае уже небольших размеров сферы Лоренца достаточно для получения достаточно точных значений поля (рис. 1).

Учитывая (9) и используя результаты работы [9], получим для точек наблюдения в месте расположения атомов пленки следующую систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} (1 - \hat{C}\hat{\Pi}(0))\mathbf{E}_l^0 &= \\ &= \mathbf{E}_{0l} - i2\pi Ca \sum_{j=1}^N \sum_{p,q=-\infty}^{\infty} [\mathbf{k}_{pq}[\mathbf{k}_{pq}\mathbf{E}_j^0]] \times \\ &\times \frac{\exp[i\mathbf{k}_{pq}(\mathbf{r}_l^0 - \mathbf{r}_j^0)]}{\kappa_{pq}}, \\ &l = \overline{1, N}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\mathbf{E}_{0l} = \mathbf{E}_{0l} \exp(i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_l^0), \quad l = \overline{1, N}.$$

Штрих у суммы в (10) означает, что слагаемое с $j = l$ не учитывается. Явный вид тензора $\hat{\Pi}(0)$ можно найти в приложении статьи [9].

5. ПОЛЕ НА ЗОНДЕ

После того как система уравнений (10) решена, можно вычислить поле в месте расположения зонда:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= \mathbf{A}_l(\mathbf{r}) + 2\pi i Ca \sum_{j=1}^N \sum_{p,q=-\infty}^{\infty} [\mathbf{k}_{pq}[\mathbf{k}_{pq}\mathbf{E}_j^0]] \times \\ &\times \frac{\exp(i\mathbf{k}_{pq}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^0))}{\kappa_{pq}}, \\ &z > 0, \end{aligned} \quad (11)$$

При выполнении условия (8) поле $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ и будет искомым полем, действующим на зонд \mathbf{E}_p .

Проведем некоторый анализ выражения (11) и попытаемся качественно объяснить некоторые

результаты, полученные в работе [9] в результате численного моделирования.

Одним из результатов работы [9] был вывод о том, что в отличие от волновой зоны вектор поляризации поля в ближней зоне не имеет определенного направления, зависит от расстояния до поверхности пленки и изменяется при перемещении точки наблюдения вдоль поверхности. Действительно, вектор поляризации отдельной эванесцентной гармоники в правой части (11) нормален вектору \mathbf{k}_{pq} , который, в свою очередь, может быть ориентирован совершенно по-разному в зависимости от p и q . Кроме того, каждая гармоника затухает со своим собственным коэффициентом затухания κ_{pq} , а ее поведение вдоль поверхности определяется ее собственным вектором $\mathbf{g}_{pq}^{\parallel}$. После проведения суммирования по всем гармоникам и получается указанное выше свойство вектора поляризации.

Другой вывод работы [9] касался распределения минимумов и максимумов интенсивности над поверхностью пленки. Рассмотрим случай нормального падения света на пленку. Для определенности положим, что внешняя волна поляризована вдоль оси y . Из рис. 3 следует, что составляющая поля, которая периодически изменяется вдоль поверхности, создается в основном поверхностными атомами, атомы объема создают лишь постоянный фон. Таким образом, для анализа поведения эванесцентных волн достаточно ограничиться лишь поверхностным монослоем ($z_j = 0$ в выражении (11)). Для проведения качественного анализа поведения поля вблизи поверхности пленки в выражении (11) достаточно оставить гармоники с числами p и q , равными $(p, q) = (1, 0), (-1, 0), (0, 1), (0, -1)$. Амплитуды остальных гармоник на порядок и более меньше указанных. Исключение составляет гексагональная решетка, для описания поля вблизи которой необходимо учитывать 6 гармоник. Подробный анализ поведения ближнего поля для этого случая можно найти в [5]. После несложных вычислений получаем выражение для интенсивности поля в месте расположения зонда:

$$\begin{aligned} I &\approx \left[E_{0l} + \operatorname{Re}((E_R)_{\text{far}}) - 4\pi Ca \times \right. \\ &\times \sum_{i=1,2} (\mathbf{g}_i)_y \{ \operatorname{Re}(\mathbf{g}_i \mathbf{E}_1^0) \cos[\mathbf{g}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] - \\ &\left. - |\mathbf{g}_i| \operatorname{Re}(E_{1z}^0) \sin[\mathbf{g}_i(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] \} \frac{\exp(-|\mathbf{g}_i|z)}{|\mathbf{g}_i|} \right]^2, \end{aligned} \quad (12)$$

где E_{0l} – амплитуда поля внешней волны, E_1^0 – амплитуда невозмущенной части поля в первом

(поверхностном) монослое, \mathbf{r}_1 – радиус-вектор произвольного атома в поверхностном слое, $(E_R)_{\text{far}}$ – амплитуда отраженной волны в волновой зоне. Фактически эта формула – квадрат у-компоненты действительной части поля на зонде. Мнимой частью у-компоненты и другими компонентами можно пренебречь.

Из вида формулы (12) сразу можно сделать вывод о том, что в общем случае из-за слагаемого, содержащего E_{1z}^0 , минимумы интенсивности сдвинуты относительно местоположений атомов. Рассмотрим случай, когда базисный вектор элементарной ячейки \mathbf{a}_3 нормален поверхности пленки. В этом случае $E_{1z}^0 = 0$ и анализ выражения (12) несколько упрощается. Теперь местам расположения атомов соответствуют минимумы интенсивности. Действительно, в этих точках $\cos[\mathbf{g}_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] = \cos[\mathbf{g}_2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] = 1$. Казалось бы, можно предположить, что максимумы интенсивности достигаются в центрах элементарных ячеек, где косинусы равны -1 . Но это не совсем так: при изменении взаимной ориентации вектора поляризации внешней волны и векторов элементарных трансляций решетки положение максимумов интенсивности изменяется. Это происходит по следующим причинам. Если, например, внешняя волна поляризована нормально одному из векторов обратной решетки, например \mathbf{g}_1 , то $(\mathbf{g}_1)_y = 0$. Поведение поля вдоль направления \mathbf{a}_1 в этом случае будет определять высшая гармоника с наименьшим коэффициентом затухания, имеющая ненулевую у-компоненту. Очевидно, что это гармоника \mathbf{g}_{11}^{\min} с модулем, минимальным из набора $|\mathbf{g}_{1,-1}^{\parallel}|, |\mathbf{g}_{1,1}^{\parallel}|; (\mathbf{g}_{11}^{\min})_y = \pm(\mathbf{g}_2)_y$. В выражении (12) в квадратных скобках добавится еще одно слагаемое:

$$-4\pi C a (\mathbf{g}_{11}^{\min})_y \operatorname{Re}(\mathbf{g}_{11}^{\min} \mathbf{E}_1^0) \times \\ \times \cos[\mathbf{g}_{11}^{\min}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)] \frac{\exp(-|\mathbf{g}_{11}^{\min}|z)}{|\mathbf{g}_{11}^{\min}|}.$$

В точках наблюдения, находящихся над атомами ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_1$), это слагаемое минимально, т.е. при условии $(\mathbf{E}_{0l} \mathbf{g}_1) = 0$ или $(\mathbf{E}_1^0 \mathbf{g}_1) = 0$ над атомами по-прежнему находятся минимумы интенсивности. Положение максимумов интенсивности находится из условия $(\mathbf{g}_{11}^{\min} \mathbf{r}) = \pi \pm 2\pi k$, где k – целое. Это условие выполняется уже не в центрах междоузлий, а в точках $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{a}_1/2$ и $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{a}_2/2$ (рис. 2а статьи [9]). Таким образом, в то время как минимумы интенсивности поля вблизи пленки соответствуют местоположениям атомов, положение максимумов интенсивности не определено и зави-

сит от взаимной ориентации поля в среде и базисных векторов решетки.

Еще один вывод, который можно сделать из анализа формулы (12), касается контрастности изображения. Под контрастностью будем понимать максимальное различие в регистрируемой интенсивности вдоль какого-либо направления. Контрастность изображения в направлении \mathbf{a}_i определяется взаимной ориентацией векторов \mathbf{E}_{0l} , \mathbf{E}_1^0 и \mathbf{g}_i . Максимальная контрастность достигается при некотором угле между \mathbf{E}_{0l} и \mathbf{g}_i , когда коэффициент $(\mathbf{g}_i)_y \operatorname{Re}(\mathbf{g}_i \mathbf{E}_1^0)$ достигает максимального значения. Этот угол в общем случае зависит как от симметрии расположения атомов на поверхности, так и от атомной поляризуемости. Более подробно этот вопрос будет рассмотрен в дальнейших работах.

Минимальная контрастность вдоль направления \mathbf{a}_1 для линий, проходящих через узлы решетки, достигается, когда вектор поляризации внешней волны или вектор поля в пленке направлен нормально вектору обратной решетки \mathbf{g}_1 (параллельно вектору прямой решетки \mathbf{a}_2) (12). Угол между двумя направлениями вектора напряженности внешнего поля, при которых достигается минимум контрастности, позволяет судить о действующих полях внутри пленки и, следовательно, об атомной поляризуемости.

Другая ситуация возникает для контрастности вдоль линий, проходящих через центры междоузлий. Минимум контрастности определяется уже не условием $(\mathbf{E}_1^0 \mathbf{g}_1) = 0$ или $(\mathbf{E}_{0l} \mathbf{g}_1) = 0$, а условием взаимной компенсации вкладов от гармоник с коэффициентами затухания $|\mathbf{g}_1|$ и $|\mathbf{g}_{11}^{\min}|$. Компенсация происходит при определенном угле (Φ_{comp}) между вектором поляризации поля в пленке и базисным вектором \mathbf{g}_1 , зависящим от симметрии расположения атомов на поверхности. Кроме того, Φ_{comp} сильно зависит от расстояния до поверхности.

Рассмотрим наиболее простой случай кубической решетки. При нормальном падении внешней волны направление напряженности поля внутри пленки совпадает с напряженностью внешнего поля. В этом случае имеются два направления вектора поляризации внешней волны, для которых вдоль линий, проходящих через центры атомов, наблюдаются минимумы контрастности. Это случаи, когда вектор напряженности совпадает по направлению с базисными векторами \mathbf{a}_1 или \mathbf{a}_2 . Для кубической решетки также можно получить явное выражение для угла Φ_{comp} , при котором наблюдается минимальная контрастность вдоль линий, проходящих через центры междоуз-

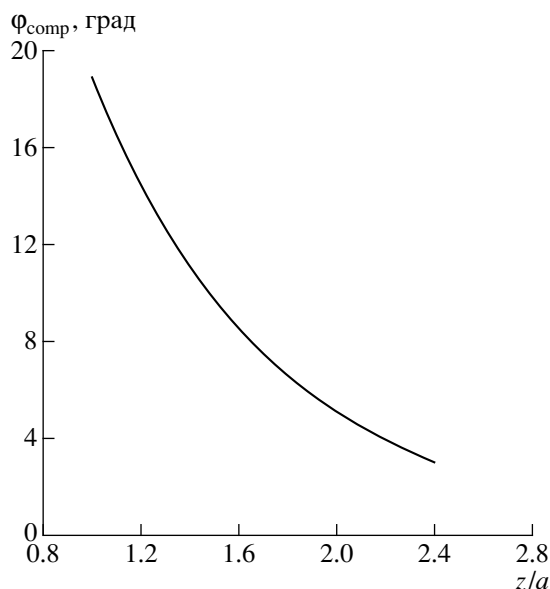


Рис. 4. Угол между направлением минимальной контрастности и вектором поляризации внешней волны Φ_{comp} как функция расстояния до поверхности пленки. Внешняя волна падает нормально поверхности пленки с кубической решеткой.

лий. Зависимость угла Φ_{comp} от расстояния между точкой наблюдения и поверхностью пленки в этом случае определяется приближенной формулой

$$\sin(\Phi_{\text{comp}}) = 2^{1/4} \exp[-\pi(\sqrt{2}-1)z/a]. \quad (13)$$

Формулой (13) можно пользоваться только для $z \geq a$. Зависимость $\Phi_{\text{comp}}(z)$ для кубической решетки приведена на рис. 4.

Таким образом, изменяя направление вектора поляризации внешней волны, можно регулировать контрастность регистрируемого изображения и по минимумам интенсивности определить местоположение атомов и, следовательно, симметрию решетки на поверхности. Измеряя угол между направлениями вектора поляризации внешней волны, при которых достигается минимальная контрастность изображения, можно судить о действующих полях внутри пленки. Обладая данной информацией и измеряя угол Φ_{comp} между направлением базисных векторов решетки и вектором поляризации внешней волны, можно определять расстояние зонда до поверхности.

Анализ, проведенный на основе формулы (9), позволяет сказать, что формула (12) остается справедливой и в случае наклонного падения s -поляризованной плоской волны. В случае наклонного падения p -поляризованной волны картина распределения поля в ближней зоне изменяется, что находится в соответствии с результатами работы [5]. За недостатком места этот вопрос будет рассмотрен подробно в отдельной статье.

6. ВЫВОДЫ

В настоящей работе решена граничная задача линейной классической оптики, в которой исследовано поведение электромагнитного поля вблизи поверхности диэлектрической среды с учетом ее дискретной структуры. Показано, что при любых соотношениях длины волны и параметра решетки амплитуда эванесцентных волн вблизи поверхности остается значительной на расстояниях не более 1.5 постоянных решетки от поверхности. Поведение интенсивности поля в ближней зоне позволяет однозначно определять положение атомов на поверхности.

Показано, что на расстояниях от пленки порядка межатомного регистрирующий зонд не оказывает существенного влияния на распределение поля в пленке. В работе предложен способ оптического контроля удаленности зонда от поверхности на основе анализа картины распределения ближнего поля при различных направлениях вектора поляризации внешнего излучения.

Полученные в данной работе результаты будут полезны не только для развития ближнепольной микроскопии сверхвысокого разрешения, но и для исследования в длинноволновом приближении фотонных кристаллов.

Работа выполнена в рамках Федеральной целевой программы "Интеграция" (грант № А 0066). Автор выражает благодарность К.В. Крутицкому за плодотворное обсуждение работы и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Barchiesi D., Girard C., Martin O.J.F., Labeke Van D., Courjon D.* // Phys. Rev. E. 1996. V. 54. P. 4285.
2. *Xiao M.* // JOSA. A. 1997. V. 14. P. 2977.
3. *Martin O.J.F., Girard C., Dereux A.* // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 526.
4. *Martin O.J.F.* // J. Microscopy. 1999. V. 194. P. 235.
5. *Miyazaki H., Ohtaka K.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 6920.
6. *Smolyaninov I.I., Atia W., Davis C.C.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 2454.
7. *Fujimura T., Itoh T., Imada A., Shimada R., Koda T., Chiba N., Muramatsu H., Miyazaki H., Ohtaka K.* // J. Luminesc. 2000. V. 87-89. P. 954.
8. *Michaelis J., Hettich C., Mlynek J., Sandoghdar V.* // Nature. 2000. V. 405. P. 325.
9. *Крутицкий К.В., Сухов С.В.* // Опт. и спектр. 2000. Т. 88. № 5. С. 827.
10. *Kawata A., Inouye Y., Sugiura T.* // Jpn. J. Appl. Phys. Part 2. 1994. V. 33. P. L1725.
11. *Секацкый С.К., Летохов В.С.* // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 65. С. 441.

12. *Rosenfeld L.* Theory of electrons. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1951.
13. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. М.: Наука, 1968.
14. *Krutitsky K.V., Suhov S.V.* // J. Phys. B. 1997. V. 30. P. 5341.
15. *Gadomsky O.N., Krutitsky K.V.* // JOSA. B. 1996. V. 13. P. 1679.
16. *Гадомский О.Н., Сухов С.В.* // ЖПС. 1998. Т. 65. № 2. С. 236.
17. *Wijers C.M.J., Poppe G.P.M.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. № 12. P. 7605.
18. *Poppe G.P.M., Wijers C.M.J., Sifhout van A.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 7917.
19. *Poppe G.P.M., Wijers C.M.J.* // Phys. B. 1990. V. 167. P. 221.
20. *Борн М., Кунь Х.* Динамическая теория кристаллических решеток. М.: ИЛ, 1958. 488 с.